

8 非線形方程式の解法

実在系の状態方程式から p - V - T の関係を知りたい場合や、波動関数の節の位置を知りたいときなどに非線形方程式を解く必要が生じる。ここでは、そのような場合に用いる数値的方法の原理を学び、Excel を用いて実際の計算を行う。

この節では主に次の書物を参考にした。

- 水島二郎，柳瀬眞一郎，『理工学のための数値計算法』，数理工学社，東京，2002
- 趙 華安，『Excel による数値計算法』，共立出版，東京，2000

8.1 二分法の原理

次の方程式の解を求めたい。

$$f(x) = 0 \quad (8.1)$$

1. $f(a_0)$ と $f(b_0)$ が異なる符号をもつように，初期値 a_0 と b_0 を決める。
式で書くと次の条件になる。

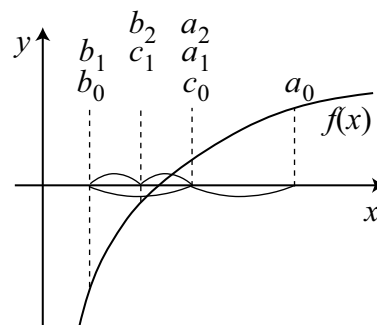
$$f(a_0)f(b_0) < 0 \quad (8.2)$$

2. a_0 と b_0 の中点を c_0 とする。

$$c_0 = \frac{a_0 + b_0}{2} \quad (8.3)$$

3. はじめに $i = 1$ とする。
4. 次のように場合分けする。

- $f(a_{i-1})$ と $f(c_{i-1})$ が異符号 ($f(a_{i-1})f(c_{i-1}) < 0$) なら， a_{i-1} と c_{i-1} の間に解が存在する。この場合， $a_i = a_{i-1}$ ， $b_i = c_{i-1}$ とする。
- $f(a_{i-1})$ と $f(c_{i-1})$ が同符号 ($f(a_{i-1})f(c_{i-1}) > 0$) なら， $f(c_{i-1})$ と $f(b_{i-1})$ が異符号 ($f(c_{i-1})f(b_{i-1}) < 0$) のはずであり，その間に解が存在する。この場合， $a_i = c_{i-1}$ ， $b_i = b_{i-1}$ とする。



5. a_i と b_i の中点を c_i とする。

$$c_i = \frac{a_i + b_i}{2} \quad (8.4)$$

6. 次の2つの条件がどちらも満たされていないならば， i を1増やし，(4)にもどって計算を繰り返す。

$$|f(c_i)| < \delta \quad (8.5)$$

$$|a_i - b_i| < \varepsilon \quad (8.6)$$

δ と ε は求める計算精度によって決まる正の定数である。

8.2 Excel による二分法の計算例

次の3次方程式を解く。

$$f(x) = 5x^3 - 7x^2 + x - 9 = 0 \quad (8.7)$$

初期値をうまく選ぶことが重要である。 $f(x)$ のグラフを書いてみて、適当な値を見つければよい。ここでは $a_0 = 0, b_0 = 3$ とする。

Excel 2007

● 準備

1. Web ページから、二分法の説明ファイルをダウンロードし、Excel で開く。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	二分法	i	a	f(a)	b	f(b)	c	f(c)	f(c)	a-b	判定δ	判定ε
2												
3												
4												
5	δ											
6	1.00E-06											
7	ε											
8	1.00E-06											

2. ワークシート名を「nibun」から「二分法」に変更する。
3. 課題提出用のファイル名で、Excel 形式で保存する。
4. A6 には収束判定に用いる δ の値が 1×10^{-6} と入力されている。
5. A8 には収束判定に用いる ε の値が 1×10^{-6} と入力されている。

● $i = 0$ の計算

1. B 列は繰り返し回数で i に相当する。B2 には数値「0」を入力。
2. C 列は a_i なので、C2 に初期値「0」を入れる。
3. D 列は関数値 $f(a_i)$ なので、D2 には C2 を相対参照して計算する数式を入力する。
4. E 列は b_i なので、E2 に初期値「3」を入れる。
5. F 列は関数値 $f(b_i)$ なので、F2 には E2 を相対参照して計算する数式を入力する（D2 をコピー & ペースト）。
6. G 列は c_i なので、G2 に数式「=(C2+E2)/2」を入れる。
7. H 列は関数値 $f(c_i)$ なので、H2 には G2 を相対参照して計算する数式を入力する（D2 をコピー & ペースト）。
8. I2:J2 は、それぞれ書かれたとおりの数式を入力する。絶対値の計算は「ABS」を用いる。
9. K2 に、収束判定のため、「=IF(I2<\$A\$6,"","×")」と入力。
10. L2 は同様に、「=IF(J2<\$A\$8,"","×")」と入力。

● $i = 1$ の計算

1. B3 には数式「=B2+1」。
2. C3 は、(4) の場合分けが必要な所で、「=IF(D2*H2<0,C2,G2)」となる。
3. 同じく、E3 には「=IF(F2*H2<0,E2,G2)」。
4. D3, F3:L3 は、それぞれ D2, F2:L2 をコピー & ペーストすればよい。

● 繰り返し計算

1. B3:L3 を選択してクリップボードにコピー
2. B4 から（適当に）L50 ぐらいまでを選択して貼り付ければ、繰り返し計算が数表になる。
3. K 列, L 列を見て「×」が両方に表示されているところを探せばよい。
4. この例の場合、 $i = 25$ ならば、 $\delta = 1 \times 10^{-6}$, $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$ の両方の条件をみたし、解は $x = 1.828822$ である。

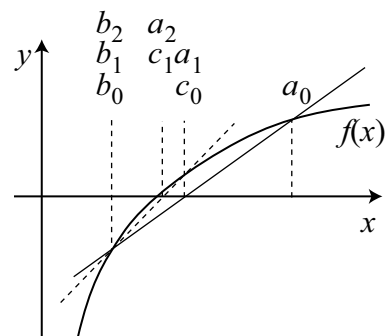
8.3 はさみうち法の原理

二分法とはさみうち法は c_i の決定法のみが異なる。はさみうち法では、 $i \geq 1$ のすべての場合で 2 点 $(a_i, f(a_i))$ と $(b_i, f(b_i))$ を通る直線と x 軸との交点を c_i とする。この直線は次のように表される。

$$y = \frac{f(a_i) - f(b_i)}{a_i - b_i}(x - a_i) + f(a_i) \quad (8.8)$$

したがって、 c_i は次の式で得られる。

$$c_i = \frac{b_i f(a_i) - a_i f(b_i)}{f(a_i) - f(b_i)} \quad (8.9)$$



この方法では a_i, b_i のうち片方だけが解に近づいていく。したがって、収束の判断は次の条件による。

$$|f(c_i)| < \delta \quad (8.10)$$

8.4 Excel によるはさみうち法の計算例

二分法とはさみうち法は c_i の決定法が異なるだけなので、ほぼ同じ要領で計算できる。

Excel 2007

● 準備

1. Web ページから、はさみうち法のファイルをダウンロードし、Excel で開く。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	はさみうち法		a	f(a)	b	f(b)	c	f(c)	f(c)	判定
2										
3										
4										
5	δ									
6	1.00E-06									

2. 「ホーム」「セル」「書式」「ワークシートの移動またはコピー」で、「二分法」と同じファイルにワークシートを移動する。
3. ワークシート名を「hasami」から「はさみうち法」に変更する。
4. A6 には収束判定に用いる δ の値が 1×10^{-6} と入力されている。

● $i = 0$ の計算

1. 二分法のワークシートの B2:F2 をはさみうち法のワークシートの B2:F2 にコピー & ペースト。
2. G2 に「=(E2*D2-C2*F2)/(D2-F2)」と入力。
3. H2 には G2 を参照して関数値を計算。
4. I2 には H2 の絶対値を計算。
5. J2 に、収束判定のため、「=IF(I2<\$A\$6,"", "×")」と入力。

● $i = 1$ の計算

1. B3 に「=B2+1」と入力。
2. 二分法のワークシートの C3:F3 をはさみうち法の C3:F3 にコピー & ペースト (c_0 が決まれば、 a_1, b_1 の決め方は二つの方法で同じ)。
3. はさみうち法のワークシートの G2:J2 を G3:J3 へコピー & ペースト。

● 繰り返し計算

1. B3:J3 をクリップボードへコピー。
2. B4 から (適当に) J50 ぐらいまでを選択して貼り付ければ、繰り返し計算が数表になる。
3. J 列を見て「×」が表示されているところを探せばよい。

4. この例の場合, $i = 31$ ならば, $\delta = 1 \times 10^{-6}$ の条件をみたし, 解は $x = 1.828822$ である。

8.5 割線法の原理

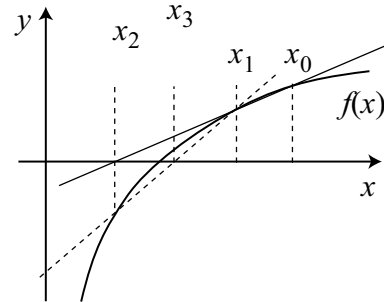
これまでの方法では, $f(a_i)$ と $f(b_i)$ が異なる符号をもつ必要がある。これは, じゃまくさい条件である。この条件を緩和した方法が割線法である。

1. 2つの初期値 x_0 と x_1 を適当に選ぶ。
2. $i = 2$ とする。
3. 2点 $(x_{i-2}, f(x_{i-2}))$ と $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ を通る直線と x 軸との交点を x_i とする。

$$x_i = \frac{x_{i-1}f(x_{i-2}) - x_{i-2}f(x_{i-1})}{f(x_{i-2}) - f(x_{i-1})} \quad (8.11)$$

4. 次の条件が満たされていないならば, i を 1 増やし, (3) にもどって計算を繰り返す。

$$|f(x_i)| = \delta \quad (8.12)$$



8.6 Excel による割線法の計算例

Excel 2007

● 準備

1. Web ページから, 割線法のファイルをダウンロードし, Excel で開く。

	A	B	C	D	E	F
1	割線法	i	x	f(x)	f(x)	判定
2						
3						
4						
5	δ					
6	1.000E-06					

2. 「ホーム」 「セル」 「書式」 「ワークシートの移動またはコピー」で, 「二分法」, 「はさみうち法」と同じファイルにワークシートを移動する。
3. ワークシート名を「kassen」から「割線法」に変更する。
4. A6 には収束判定に用いる δ の値が 1×10^{-6} と入力されている。

● $i = 0$ の計算

1. B 列は繰り返し回数 i なので, B2 に数値「0」を入力。
2. C 列は x なので, C2 に適当な初期値 (ここでは「0」) を入力。
3. D 列は関数値なので, D2 には C2 を相対参照して計算する数式を入力。
4. E 列は D 列の絶対値なので, E2 には D2 の絶対値を計算する。
5. F2 に, 収束判定のため, 「=IF(E2<\$A\$6,"", "x")」と入力。

● $i = 1$ の計算

1. B3 に数式「=B2+1」を入力。
2. C3 に適当な初期値 (ここでは「3」) を入力。
3. D3:F3 は D2:F2 をコピー & ペースト。

● $i = 2$ の計算

1. B4 は B3 をコピー & ペースト。
2. C4 に数式「=(C3*D2-C2*D3)/(D2-D3)」を入力。
3. D4:F4 は D3:F3 をコピー & ペースト。

● 繰り返し計算

1. B4:F4 をクリップボードにコピー。

2. B5 から (適当に) F50 行目ぐらいまでに貼り付ければ、繰り返し計算が数表になる。
3. F 列を見て「」が表示されているところを探せばよい。
4. この例の場合、 $i = 36$ ならば、 $\delta = 1 \times 10^{-6}$ の条件をみたし、解は $x = 1.828822$ である。
5. 41 行目以降でエラーメッセージ「#DIV/0!」が表示されるが、これは「0 で割る計算を行った」というエラーである。

8.7 ニュートン法の原理

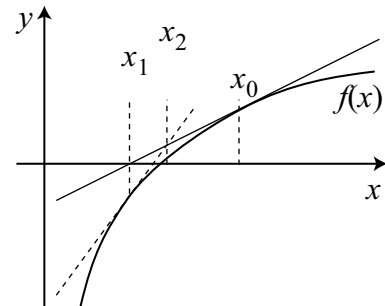
ニュートン法は、 $f(x)$ の導関数 $f'(x)$ がわかっているときに用いることのできる、効率的な方法である。

1. はじめに初期値 x_0 を適当に選ぶ。
2. $i = 1$ とする。
3. $x = x_{i-1}$ における $f(x)$ の接線と x 軸との交点を x_i とする。
接線の方程式は次のように与えられる。

$$y = f'(x_{i-1})(x - x_{i-1}) + f(x_{i-1}) \quad (8.13)$$

したがって、 x_i は次のように与えられる。

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})} \quad (8.14)$$



4. 次の条件が満たされていないならば、 i を 1 増やし、(3) にもどって計算を繰り返す。

$$|f(x_i)| = \delta \quad (8.15)$$

8.8 Excel によるニュートン法の計算例

ここで用いている例の場合、導関数は次のように与えられる。

$$f'(x) = 15x^2 - 14x + 1 \quad (8.16)$$

Excel 2007

● 準備

1. Web からニュートン法のファイルをダウンロードし、Excel で開く。

	A	B	C	D	E	F	G
1	ニュートン法		x	f(x)	f'(x)	f(x)	判定
2							
3							
4							
5		δ					
6		1.00E-06					

2. 「ホーム」「セル」「書式」「ワークシートの移動またはコピー」で、これまでの3つの方法と同じファイルにワークシートを移動する。
3. ワークシート名を「newton」から「ニュートン法」に変更する。
4. A6 には収束判定に用いる δ の値が 1×10^{-6} と入力されている。

● $i = 0$ の計算

1. B 列は繰り返し回数 i なので、B2 に数値「0」を入力。
2. C 列は x なので、C2 に適当な初期値 (ここでは「0」) を入力。
3. D 列は関数値 $f(x_i)$ なので、D2 には C2 を相対参照して計算する数式を入力。
4. E 列は導関数値 $f'(x_i)$ なので、E2 には C2 を相対参照して計算する数式を入力。
5. F 列は D 列の絶対値なので、F2 には D2 の絶対値を計算する。
6. G2 に、収束判定のため、「=IF(F2<\$A\$6,"",x)」と入力。

- $i = 1$ の計算
 1. B3 に数式「=B2+1」を入力。
 2. C3 には数式「=C2-D2/E2」を入力。
 3. D3:G3 には D2:G2 をコピー & ペースト。
 - 繰り返し計算
 1. B3:G3 をクリップボードにコピー。
 2. B4 から (適当に) G50 ぐらいまでに貼り付ければ , 繰り返し計算が数表になる。
 3. G 列を見て「 」が表示されているところを探せばよい。
 4. この例の場合 , はじめ解から遠ざかるが , $i = 10$ で $f(x_i) = 0$ になる。解は他の方法と同じ。
-